

Fragen der numerischen Integration bei stochastischen finiten Elementen für nichtlineare Probleme

Andreas Keese und Hermann G. Matthies
Institut für Wissenschaftliches Rechnen
Technische Universität Braunschweig
Braunschweig, Germany

Informatikbericht Nr.: 2003-4

Mai 2003



Fragen der numerischen Integration bei stochastischen finiten Elementen für nichtlineare Probleme

Andreas Keese und Hermann G. Matthies
Fachbereich für Mathematik und Informatik
Technische Universität Braunschweig
Braunschweig, Germany

Informatikbericht Nr.: 2003-4

Mai 2003

Erweiterte Version eines Vortrags auf der
„International Conference on the Applications
of Computer Science and Mathematics,
Architecture and Civil Engineering (IKM 2003)“,
Weimar, 2003

Adresse

Institut für Wissenschaftliches Rechnen
Technische Universität Braunschweig
Hans-Sommer-Strasse 65
D-38106 Braunschweig

Anschrift

Institut für Wissenschaftliches Rechnen
Technische Universität Braunschweig
D-38092 Braunschweig
Germany

Kontakt

Telefon: +49-(0)531-391-3000
Fax: +49-(0)531-391-3003
E-Mail: wire@tu-bs.de
www: <http://www.tu-bs.de/institute/WiR>

Copyright

2002 ©Institut für Wissenschaftliches Rechnen
Technische Universität Braunschweig

Fragen der numerischen Integration bei stochastischen finiten Elementen für nichtlineare Probleme

Andreas Keese und Hermann G. Matthies
Institut für Wissenschaftliches Rechnen
Technische Universität Braunschweig

Zusammenfassung

Wir beschreiben numerische Verfahren zur Lösung stationärer nichtlinearer Probleme mit stochastischen Unsicherheiten im Operator, in den Randbedingungen und in den Lasten. Dabei vergleichen wir hochdimensionale (Smolyak-) Quadraturverfahren mit Monte Carlo-Integrationsverfahren zur direkten Berechnung von Statistiken der Lösung. Zusätzlich berechnen wir die Lösung mit einem Galerkin-Verfahren in einem Raum stochastischer Ansatzfunktionen und untersuchen die Auswertung der im Residuum auftretenden hochdimensionalen Integrale. Für das entstehende große gekoppelte nichtlineare Gleichungssystem stellen wir einen effizienten Löser vor. Schließlich berechnen wir die Lösung durch direkte Projektion auf den orthogonalen stochastischen Ansatzraum und vergleichen die beschriebenen Lösungsverfahren anhand von Modellproblemen.

1 Einleitung

In numerischen Simulationen herrscht häufig Unsicherheit über die Parameter des Modells. So sind in den hier betrachteten prototypischen Modellen für Grundwasserfluß nur in Ausnahmefällen die hydraulische Leitfähigkeit, Quellterme oder Randbedingungen exakt bekannt. Aus der Unsicherheit im Modell ergibt sich eine Unsicherheit in der berechneten Systemantwort, welche in den etablierten Simulationsverfahren normalerweise nicht erfaßt wird.

Eine Möglichkeit zur Quantifizierung der Unsicherheiten ist eine stochastische Beschreibung. Dabei werden unsichere räumlich verteilte Systemparameter durch stochastische Felder [1, 39, 8] beschrieben. Ist das ursprüngliche Modell eine partielle Differentialgleichung, so ergibt sich hiermit als Modell eine stochastische partielle Differentialgleichung (engl.: stochastic partial differential equation \equiv SPDE), und die Lösung bzw. Systemantwort ist ebenfalls ein stochastisches Feld. Dies wird in Abschnitt 2 diskutiert.

Es existieren verschiedene mathematische Modelle für SPDE. Holden et al. zeigen in [17] Lösungsmethoden für SPDE, bei denen Multiplikationen zwischen

stochastischen Feldern durch Wick-Produkte erfolgen. Dies erlaubt die Verwendung irregulärer stochastischer Felder als Koeffizienten, allerdings wird in diesem Modell z.B. bei linearen Problemen der Mittelwert der Systemantwort nicht durch höhere statistische Momente der Systemparameter beeinflusst, im Gegensatz zu Ergebnissen der Homogenisierungstheorie. Die ursprüngliche in [17] verlangte Lösbarkeit im starken Sinne, die erhebliche Einschränkungen bzgl. der Randbedingungen und Quellterme nach sich zieht, konnte in [24] durch Einbettung in ein Galerkin-Verfahren zwar auf ein bei variationeller Formulierung übliches Maß gelockert werden, aber das Wick-Produkt scheint nicht das geeignete Modell für die hier angestrebte Problemklasse zu sein. Verwendet man statt des Wick- das gewöhnliche Produkt, so ist eine gewisse stochastische Regularität der Koeffizientenfelder nötig [6]. Dies ist ein wichtiger Baustein für eine variationelle Theorie von SPDE mit gewöhnlichem Produkt, die in [5] schon früher formuliert und bezüglich ihrer Approximierbarkeit mit finiten Elementen untersucht wurde. Weitere Arbeiten mit spezielleren stochastischen Annahmen findet man in [3, 4].

Fast immer ist das Ziel die Berechnung von Statistiken der Systemantwort. Dies kann durch Monte Carlo-Verfahren geschehen, siehe z.B. [7, 34]. Um den hiermit verbundenen hohen Rechenaufwand zu reduzieren, sind alternative Verfahren entwickelt worden, beispielsweise Störungsansätze, siehe z.B. [21], auf Neumann-Reihen basierende Verfahren, siehe z.B. [14, 3], oder das hier genutzte spektrale stochastische finite Element-Verfahren (SSFEM) [14]. In letzterem werden die stochastischen Parameter in Eigenfunktionen ihrer Kovarianzkerne entwickelt und die Lösung durch ein Galerkin-Verfahren auf einem stochastischen Ansatzraum bestimmt. Man kann dies als eine Antwortfläche (“response surface”) sehen. Wir nutzen in Abschnitt 5 als Alternative zur Monte Carlo-Integration hochdimensionale Smolyak-Quadraturverfahren (engl.: sparse quadrature), welche zuerst in [36] beschrieben wurden und in jüngerer Zeit weiterentwickelt wurden, siehe z.B. [28, 30, 32]. Allgemeine Übersichten über stochastische finite Elemente finden sich in [23, 34, 37, 18].

Stochastische Galerkin-Verfahren sind auf diverse lineare Probleme mit stochastischem Operator angewendet worden, siehe z.B. [11, 12, 31], in jüngerer Zeit sind auch nichtlineare Probleme mit stochastischen Lasten behandelt worden, siehe z.B. [42]. Erst wenige Arbeiten behandeln nichtlineare Probleme mit stochastischem Operator. In Abschnitt 7.1 beschreiben wir ein Verfahren für nichtlineare Randwertprobleme mit stochastischen Unsicherheiten im Operator und in den Quelltermen. Die SPDE wird durch ein Galerkin-Verfahren in Tensorprodukten aus räumlichen finiten Elementen und stochastischen Ansatzfunktionen diskretisiert. Dies führt auf ein großes nichtlineares System gekoppelter Gleichungen. Eine zu überwindende Schwierigkeit war hierbei die numerische Berechnung der auftretenden hochdimensionalen Integrale, und wir zeigen daß sich hierfür Smolyak Quadratur-Verfahren anbieten. Die Lösung des großen gekoppelten Gleichungssystems

chungssystems geschieht effizient durch ein vorkonditioniertes BFGS-Verfahren, siehe z.B. [26].

Alternativ wird in Abschnitt 7.2 ein Lösungsverfahren vorgestellt, in welchem die Lösung direkt durch orthogonale Projektion auf den Ansatzraum berechnet wird. Statt eines großen gekoppelten Gleichungssystems führt dies zu vielen kleinen, ungekoppelten Gleichungssystemen, und man erkennt Parallelen zu den ursprünglichen Monte Carlo-Verfahren.

Wir konzentrieren uns hier auf Aspekte der hochdimensionalen Quadratur. In weiteren Arbeiten gehen wir näher auf den nichtlinearen Löser ein [19, 20] und diskutieren Aspekte nicht-Gaußscher stochastischer Felder und der für die Vorkonditionierung genutzten linearen Löser [25].

2 Stochastischer nichtlinearer Grundwasserfluß

Unser Anwendungsfall ist ein prototypisches Grundwasserflußproblem, obwohl die vorgestellten Verfahren auf beliebige nichtlineare Probleme mit stochastischen Unsicherheiten anwendbar sind. Zur Verdeutlichung einiger Aspekte des Lösungsprozesses verwenden wir außerdem ein noch einfacheres Beispiel mit nur einem räumlichen Freiheitsgrad.

Ein prototypisches einfaches Modell für Grundwasserfluß mit nichtlinearem Diffusionsverhalten in einem Gebiet $R \subset \mathbb{R}^d$ ist das Randwertproblem

$$(1) \quad -\nabla \cdot (\hat{\kappa}(x, u) \nabla u(x)) = f(x), \quad x \in R$$

mit geeigneten Randbedingungen. Dabei sind u der hydraulische Druck und f die Quell- und Senkenterme. Die Leitfähigkeit $\hat{\kappa}$ hängt vom hydraulischen Druck und der Bodenbeschaffenheit ab, welche wir durch ein weiteres Feld $\kappa(x), x \in R$ modellieren. Wir wählen $\hat{\kappa}(x, u) = \kappa(x) + cu(x)^2$, $c > 0$. Die später vorgestellten Verfahren nutzen keine besonderen Eigenschaften dieser Beziehung und sind daher für beliebige Materialgesetze anwendbar.

Die Unsicherheit in den Bodeneigenschaften wird quantifiziert, indem $\kappa(x)$ für alle $x \in R$ als Zufallsvariable $\kappa(x) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ auf einem geeigneten Wahrscheinlichkeitsraum Ω modelliert wird. Somit erhalten wir ein stochastisches Feld $\kappa : R \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ [1, 39, 8]. Der Wahrscheinlichkeitsraum enthält in der Regel unendlich viele unabhängige Zufallsvariablen, und so wie der euklidische Raum die drei Koordinatenachsen x, y, z besitzt, so entspricht in einem Wahrscheinlichkeitsraum jede unabhängige Zufallsvariable einer Koordinatenachse. Ω ist also praktisch ein unendlich-dimensionaler Raum. Man kann Ω als Menge aller “möglichen Bodeneigenschaften” bzw. aller Realisierungen $\kappa(\cdot, \omega) : R \rightarrow \mathbb{R}$, $\omega \in \Omega$, auffassen (vgl. auch Abb. 1). Eine vollständige Beschreibung impliziert die Festlegung aller gemeinsamer Statistiken der Zufallsvariablen $\kappa(x_1), \dots, \kappa(x_m)$, $m \in \mathbb{N}$,

$x_1, \dots, x_m \in R$, siehe z.B. [1] für Details. Aus Messungen sind oft nur Statistiken zweiter Ordnung (Mittelwert und Kovarianz) sowie die Marginalverteilungen der $\kappa(x)$, $x \in R$ bekannt, siehe z.B. [33, 8]. Diese kann man durch eine ortsabhängige Punkt-Transformation

$$(2) \quad \kappa(x, \omega) = \phi(x, \gamma(x, \omega)), \quad x \in R, \omega \in \Omega,$$

eines Gaußverteilten Zufallsfeldes $\gamma(x, \omega)$ festlegen, welches durch seinen Mittelwert $\mu_\gamma(x)$ und seine Kovarianz $\text{cov}_\gamma(x, y)$ definiert wird.

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit wählen wir $\mu_\gamma(x) = 0$ und $\text{var}_\gamma(x) = \text{cov}_\gamma(x, x) = 1$. Es ist wohlbekannt, daß eine standardnormalverteilte Zufallsvariable $\mathcal{N}(0, 1)$ durch die nichtlineare Transformation $F_\kappa^{-1}(\text{erf}(\mathcal{N}(0, 1)))$ auf eine Zufallsvariable mit Verteilungsfunktion F_κ abgebildet wird. Dabei bezeichnen F_κ^{-1} ihre Umkehrfunktion und erf die Gaußsche Verteilungsfunktion. Durch geeignete Wahl von ϕ läßt sich daher jede Marginalverteilung für $\kappa(x, \omega)$ einstellen. Wenn $\text{cov}_\kappa(x, y)$ und $\mu_\kappa(x)$ aus Messungen bekannt sind, können ϕ und $\text{cov}_\gamma(x, y)$ passend gewählt werden. Für ein physikalisch und mathematisch wohldefiniertes Modell sollte $\kappa(x, \omega)$ von oben und unten beschränkt sein,

$$(3) \quad 0 < \kappa_-(x) < \kappa(x, \omega) < \kappa_+(x) < \infty, \quad x \in R.$$

Im Modellbeispiel stellen wir dies sicher, indem wir die (sinus-halbwellenförmige) $\beta(1/2, 1/2)$ -Verteilung verwenden. Die genutzte Transformation ist

$$(4) \quad \kappa(x, \omega) = c_1(x) + c_2(x) \arccos(\text{erf}(\gamma(x, \omega))).$$

Auch Unsicherheiten in den übrigen Parametern des Randwertproblems Gl. (1) lassen sich als stochastische Felder modellieren, und so ergibt sich als stochastische PDE

$$(5) \quad -\nabla \cdot (\kappa(x, u, \omega) \nabla u(x, \omega)) = f(x, \omega), \quad x \in R,$$

$$(6) \quad \frac{\partial}{\partial n} (\kappa(x, u, \omega)) \nabla u(x, \omega) = f_N(x, \omega), \quad x \in \Gamma_N, \quad \Gamma_N \cup \Gamma_D = \partial R$$

$$(7) \quad u(x, \omega) = f_D(x, \omega), \quad x \in \Gamma_D$$

für $\omega \in \Omega$. Der hydraulische Druck als Lösung ist ebenfalls ein stochastisches Feld $u(x, \omega)$, und uns interessieren ortsabhängige Statistiken der Lösung, zum Beispiel ihr Mittelwert $\mu_u(x) = \mathbf{E}(u(x))$, ihre Kovarianz $\text{cov}_u(x, y) = \mathbf{E}((u(x) - \mu_u(x))(u(y) - \mu_u(y)))$, oder ihre Wahrscheinlichkeit $p_u(x) = P\{u(x) > u_0\} = \mathbf{E}(\chi_{(u_0, \infty)}(u(x, \omega)))$, einen Wert zu überschreiten. Hierbei ist χ_A die charakteristische Funktion der Menge A . All diese Statistiken $s_u(x)$ sind Integrale der Form

$$(8) \quad s_u(x) = \mathbf{E}(s(u(x))) = \int_{\Omega} s(u(x, \omega)) d\Gamma(\omega),$$

wobei $d\Gamma(\omega)$ bedeutet, daß bezüglich des Gaußmaßes zu integrieren ist.

Die numerische Lösung des stochastischen Randwertproblems Gl. (5) erfordert eine Diskretisierung im Raum und—unabhängig davon—eine Diskretisierung in der stochastischen Dimension. Die räumliche Diskretisierung ist fast beliebig; wir wählen in Abschnitt 3 finite Elemente und beschreiben stochastische Diskretisierungsverfahren in den darauf folgenden Abschnitten.

Statistiken bzw. Integrale der Form Gl. (8) können beispielsweise durch Monte Carlo-Simulationen des räumlich diskretisierten Problems approximiert werden. Allerdings kann dies nicht direkt erfolgen, da der der Wahrscheinlichkeitsraum Ω unendlich viele unabhängige Zufallsvariablen enthält und daher Gl. (8) ein Integral in einem unendlich-dimensionalen Raum darstellt. Bevor die stochastische Dimension numerisch behandelt werden kann, muß die SPDE Gl. (5) daher in einem endlichdimensionalen Wahrscheinlichkeitsraum approximiert werden. Dies wird in Abschnitt 4 beschrieben.

3 Räumliche Diskretisierung

Die räumliche Diskretisierung kann fast beliebig sein, z.B. mit Standardtechniken wie finiten Differenzen oder finiten Elementen erfolgen. Die Verwendung finiter Elemente auf dem Gebiet $R \subset \mathbb{R}^d$ mit einem Vektor von Ansatzfunktionen $\mathbf{N}(x) = (N_1(x), \dots, N_n(x))$ führt auf den Ansatz

$$(9) \quad u_n(x, \omega) = \sum_{i=1}^n u_i(\omega) N_i(x) = \mathbf{N}(x) \mathbf{u}(\omega), \quad x \in R, \omega \in \Omega$$

wobei die Freiheitsgrade aus n Zufallsvariablen $\mathbf{u}(\omega) = (u_1(\omega), \dots, u_n(\omega))^T$, $\omega \in \Omega$ bestehen. Eine Analogie hierzu ist die Linien-Methode oder Semidiskretisierung für zeitabhängige Randwertprobleme, welche zu zeitabhängigen Freiheitsgraden führt.

Einsetzen von Gl. (9) in das stochastische Randwertproblem Gl. (5) und Anwenden von Galerkin-Bedingungen ergibt ein System nichtlinearer stochastischer Gleichungen

$$(10) \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}(\omega), \omega) = 0 \quad \text{für } \Gamma\text{-fast-alles } \omega \in \Omega.$$

4 Diskretisierung der stochastischen Felder

Die numerische Behandlung erfordert eine Approximation der stochastischen Felder in einer endlichen Zahl unabhängiger Zufallsvariablen. Dies wird hier exemplarisch für den Bodenparameter $\kappa(x, \omega) = \phi(x, \gamma(x, \omega))$ aus Gl. (2) ausgeführt.

Die Karhunen–Loève-Entwicklung (KL-Entwicklung), siehe z.B. [38, 1], stellt ein stochastisches Feld in abzählbar vielen unkorrelierten Zufallsvariablen dar. Für das Gaußsche Feld γ mit $\mathbf{E}(\gamma(x)) = 0$ ergibt sich die Darstellung

$$(11) \quad \gamma(x, \omega) = \lim_{m \rightarrow \infty} \gamma_m(x, \omega), \quad \gamma_m(x, \omega) = \sum_{i=1}^m \sqrt{\lambda_i} g_i(x) \omega_i, \quad x \in R$$

mit unkorrelierten und damit unabhängigen standardnormalverteilten Zufallsvariablen $\omega = (\omega_1, \omega_2, \dots)$, also $\mathbf{E}(\omega_i) = 0$, $\mathbf{E}(\omega_i \omega_j) = \delta_{ij}$ für $i, j \in \mathbb{N}$. Hierbei sind $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_i \geq \dots \geq 0$ die Eigenwerte und $g_i \in L_2(R)$ die Eigenfunktionen des Fredholm-Operators

$$(12) \quad (C_\gamma g)(x) = \int_R \text{cov}_\gamma(x, y) g(y) dy = \lambda_i g_i(x).$$

Meist sind die Eigenfunktionen nicht analytisch bekannt, aber sie können durch numerische Standardverfahren mit beliebiger Genauigkeit angenähert werden, siehe z.B. [2]. Die KL-Entwicklung ist optimal in dem Sinn, daß der L_2 -Fehler $\|\gamma(x, \omega) - \gamma_m(x, \omega)\|_{L_2(\Omega)} = \sqrt{\text{var}(\gamma(x) - \gamma_m(x))}$ unter allen Approximationen in m unkorrelierten Zufallsvariablen minimal ist, siehe z.B. [14].

Den Bodenparameter approximieren wir in einer endlichen Zahl unabhängiger Zufallsvariablen als $\kappa_m(x, \omega) = \phi(x, \gamma_m(x, \omega))$, wobei jetzt $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_m)$ ist. Alternativ kann in jedem $x \in R$ der exakte Mittelwert und die exakte Varianz zum Preis einer schlechteren Übereinstimmung der räumlichen Korrelation und einer höheren Varianz des Fehlers erhalten werden, indem das approximierte Gaußfeld ortsabhängig geeicht wird.

Wir verwenden die KL-Entwicklung von γ und nicht die von κ , da letztere nur eine Darstellung in unkorrelierten, nicht aber in unabhängigen Zufallsvariablen liefern würde. Die Nutzung der KL-Entwicklung von κ und weitere Aspekte der Diskretisierung stochastischer Felder diskutieren wir in [25].

Je größer die Zahl der verwendeten Eigenfunktionen ist, desto kleinere räumliche Schwankungen können aufgelöst werden. In Abbildung 4 wird dies beispielhaft für zwei Realisierungen des stochastischen Feldes $\kappa(x, \omega)$ in KL-Entwicklungen mit 50 bzw. 20 Termen demonstriert.

Werden die KL-Reihen aller stochastischen Felder nach einer endlichen Zahl Terme abgebrochen und in insgesamt m unabhängigen Gaußvariablen dargestellt, so ergibt sich eine Approximation des räumlich diskretisierten Systems Gl. (10) im endlichdimensionalen Wahrscheinlichkeitsraum $\Omega^{(m)}$ mit m -dimensionalem Gaußmaß Γ_m ,

$$(13) \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}(\omega), \omega) = 0 \quad \omega = (\omega_1, \dots, \omega_m) \in \Omega^{(m)}.$$

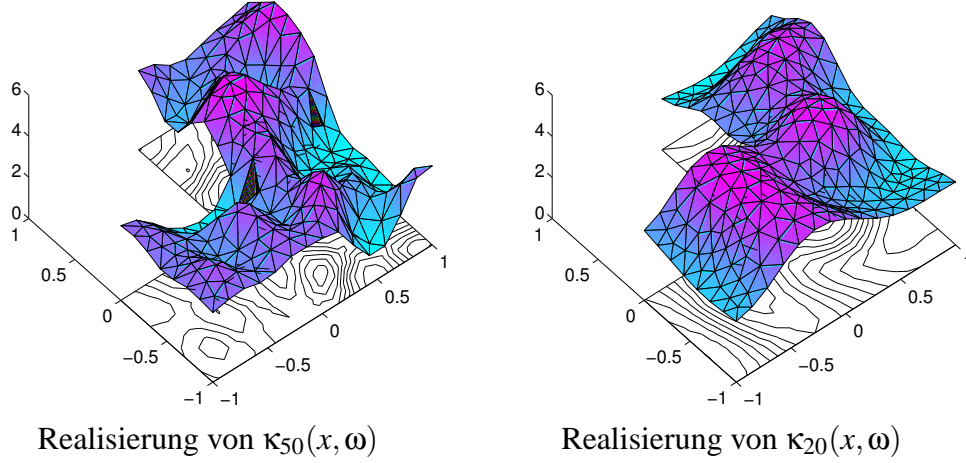


Abbildung 1: Realisierungen von $\kappa_m(x, \omega)$ auf einem L-förmigen Gebiet für unterschiedlich viele KL-Terme.

5 Hochdimensionale Integration

Die räumliche Diskretisierung und die Darstellung in einem endlichdimensionalen Wahrscheinlichkeitsraum erlauben die numerische Berechnung von Lösungsstatistiken des Grundwasserflußproblems. Ist $\mathbf{u}(\omega)$ die Lösung von Gl. (13), so können Statistiken der Form Gl. (8) als $s_u(x) = \mathbf{E}(s(\mathbf{N}(x)\mathbf{u}(\omega)))$ berechnet werden. Mit einem geeigneten $\psi : \Omega^{(m)} \rightarrow \mathbb{R}$ sind also Erwartungswerte

$$(14) \quad s := \mathbf{E}(\psi(\omega)) = \int_{\Omega^{(m)}} \psi(\omega) d\Gamma_m(\omega) = \int_{\mathbb{R}} \cdots \int_{\mathbb{R}} \psi(\omega_1, \dots, \omega_m) d\Gamma_1(\omega_1) \cdots d\Gamma_1(\omega_m)$$

zu bilden, wobei $d\Gamma_1(\omega_i) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\omega_i^2/2) d\omega_i$ das eindimensionale Gaußmaß bezeichnet. Auch die im nächsten Abschnitt beschriebenen stochastischen Galerkin-Verfahren verwenden derartige hochdimensionale Integrale.

Je nach Dimensionsanzahl und Eigenschaften von ψ eignen sich unterschiedliche Verfahren für die numerische Integration. Häufig werden in der stochastischen Mechanik Monte Carlo- und Quasi-Monte Carlo-Verfahren genutzt. Auch die für Zuverlässigkeitsuntersuchungen genutzten FORM- und SORM-Verfahren, siehe z.B. [16], sind Integrationsverfahren, die speziell für Versagensfunktionen ψ geeignet sind.

Hier werden Monte Carlo- und Quasi-Monte Carlo-Verfahren, siehe z.B. [7], sowie volle Tensor-Quadratur-Verfahren und Smolyak Quadratur-Verfahren [36] diskutiert. Alle genannten Verfahren werten den Integranden an Z Integrations-

punkten $\omega^{(1)}, \dots, \omega^{(Z)} \in \Omega^{(m)}$ aus und berechnen die Näherung s_Z von Gl. (14) als gewichtete Summe

$$s_Z = \sum_{i=1}^Z w_i \psi(\omega^{(i)}).$$

Monte Carlo-Verfahren (MC-Verfahren) nutzen als Integrationspunkte pseudo-zufällige, unabhängige Realisierungen $\omega^{(1)}, \dots, \omega^{(Z)} \in \Omega^{(m)}$ von $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_m)$ und konstante Gewichte $w_i = Z^{-1}$. Durch die zufällige Wahl der Integrationspunkte sind MC-Verfahren probabilistisch: die Näherung s_Z und damit auch der Fehler $\varepsilon_Z^{(MC)} = s - s_Z$ sind Zufallsvariablen. Für große Z ist der Fehler $\varepsilon_Z^{(MC)} \approx Z^{-1/2} \mathcal{N}(0, \sigma)$, wobei $\mathcal{N}(0, \sigma)$ eine Gaußsche Zufallsvariable und σ die Standardabweichung des Integranden ψ bezeichnet. Die Größenordnung des MC-Fehlers $\varepsilon_Z^{(MC)}$ ist somit $\varepsilon_Z^{(MC)} = O(\sigma Z^{-1/2})$. MC-Verfahren konvergieren langsam—um z.B. den Fehler um eine Größenordnung zu reduzieren, muß die Anzahl der Auswertungen Z um zwei Größenordnungen erhöht werden. Sie eignen sich für Integranden mit kleiner Varianz und für geringe Genauigkeitsanforderungen. Ihre Effizienz kann durch Kombination mit Varianzreduktionsverfahren und Importance-Sampling verbessert werden, siehe z.B. [7]. Der entscheidende Vorteil von MC-Verfahren ist die Unabhängigkeit des Integrationsfehlers von der Dimensionszahl—der Aufwand der anderen hier vorgestellten Verfahren wächst mit der Dimensionszahl. Für sehr viele stochastische Dimensionen sind darum in der Regel MC-Verfahren am effizientesten.

Eine Alternative zu Monte Carlo-Verfahren sind Quasi-Monte Carlo-Verfahren (QMC-Verfahren), siehe z.B. [27, 7]. Sie wählen die Integrationspunkte so, daß das Integral $\mathbf{E}(1)$ besonders gut approximiert wird. Derartige Punktfolgen nennt man Quasi-Zufallszahlen oder Folgen niedriger Diskrepanz [27]. Der Integrationsfehler verhält sich für gängige QMC-Verfahren wie $\varepsilon_Z^{(QMC)} = O(\|\psi\|_{BV} Z^{-1} (\log Z)^m)$, wobei $\|\psi\|_{BV}$ die Norm der beschränkten Variation bezeichnet. Für nicht zu große Dimensionen und glatte Integranden können QMC-Verfahren effizienter als MC-Verfahren sein [7], da dann der Term Z^{-1} den Fehler dominiert.

Die Effizienz von MC-Verfahren hängt von der Standardabweichung $\sigma = \|\psi - \mathbf{E}(\psi)\|_{L_2(\Omega^{(m)})}$ ab, die Effizienz von QMC-Verfahren berücksichtigt außerdem erste partielle Ableitungen des Integranden. Glattheit höherer Ordnung wird durch MC- oder QMC-Verfahren nicht ausgenutzt. Hingegen hängt die Effizienz von üblichen Quadratur-Formeln von der Glattheit des Integranden ab, so auch bei Smolyak-Quadraturformeln. Sie werden hier aus eindimensionalen Quadraturformeln konstruiert, und wie in [30] verwenden wir die Gauß-Hermite-Quadraturformeln. Es bezeichne Q_z die Gauß-Hermite-Quadraturformel in $z \in \mathbb{N}$ Integrationspunkten $\omega^{(z,i)} \in \mathbb{R}$ und Gewichten $w_{z,i}$, $i = 1, \dots, z$. Das Integral einer

Funktion $\psi_1 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bezüglich des Gaußmaßes ist dann

$$(15) \quad \mathbf{E}(\psi_1) = \int_{\mathbb{R}} \psi_1(\omega_1) d\Gamma_1(\omega_1) \approx Q_z(\psi_1) := \sum_{i=1}^z w_{z,i} \psi_1(\omega^{(z,i)}).$$

Das numerische Ergebnis ist exakt, wenn ψ_1 ein Polynom von Grad $\leq 2z - 1$ ist, und für r -fach stetig ableitbare Funktionen $\psi_1 \in C^r(\mathbb{R})$ ist der Quadraturfehler $\epsilon_z^{(GH1)} = O(z^{-(2r-1)})$. Die Quadratur von Gl. (14) kann durchgeführt werden, indem in jeder Dimension das eindimensionale Quadraturverfahren Gl. (15) benutzt wird. Es ergibt sich

$$(16) \quad \mathbf{E}(\psi) \approx (Q_z \otimes \cdots \otimes Q_z)\psi = \sum_{i_1=1}^z \cdots \sum_{i_m=1}^z w_{k,i_1} \cdots w_{k,i_m} \psi(\omega^{(k,i_1)}, \dots, \omega^{(k,i_m)}).$$

Dieses volle Tensorprodukt Quadratur-Verfahren benutzt somit $Z = z^m$ Integrationspunkte auf einem regulären Gitter. Der Approximationsfehler hat die Ordnung $\epsilon_Z^{(Q)} = O(Z^{-(2r-1)/m})$. Die exponentielle Zunahme des Aufwands mit der Zahl der Dimensionen wird als “Fluch der Dimensionen” bezeichnet, siehe z.B. [28]. Sie macht eine Verwendung in hohen stochastischen Dimensionen praktisch unmöglich.

Als Alternative bieten sich Smolyak-Quadraturverfahren an, siehe z.B. [36, 30, 32]. Sie erzielen bei Z Auswertungen des Integranden einen asymptotischen Integrationsfehler $\epsilon_Z^{(S)} = O(Z^{-r}(\log Z)^{(m-1)(r+1)})$ bei Z Auswertungen des Integranden [29]. Die Idee der Smolyak-Konstruktion ist, in nur wenigen Dimension Quadraturformeln hoher Ordnung zu nutzen, während in den anderen Dimensionen Quadraturformeln niedriger Ordnung genutzt werden. Mit $|\mathbf{k}| = \sum_i k_i$ ergibt sich als Smolyak-Quadraturformel

$$S_k^m := \sum_{k \leq |\mathbf{k}| \leq k+m-1} (-1)^{k+m-1-|\mathbf{k}|} \binom{m-1}{|\mathbf{k}|-k} \cdot Q_{z_1} \otimes \cdots \otimes Q_{z_m}.$$

Details zur Konstruktion und Nutzung der Quadraturformeln finden sich z.B. in [29, 30, 32]. Eine detailliertere Beschreibung geben wir außerdem in [20].

Für festes k wächst die Zahl der Auswertungen deutlich langsamer als für volle Tensorprodukt-Quadratur. Die Smolyak-Quadraturformel S_k^m integriert multivariate Polynome $\omega_1^{k_1} \cdots \omega_N^{k_m}$ mit totalem Grad $\sum_{i=1}^m k_i \leq 2k - 1$ exakt.

5.1 Numerische Experimente zur hochdimensionalen Integration

Wir vergleichen experimentell die direkte Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung für die Lösung des nichtlinearen Grundwasserflußproblems per

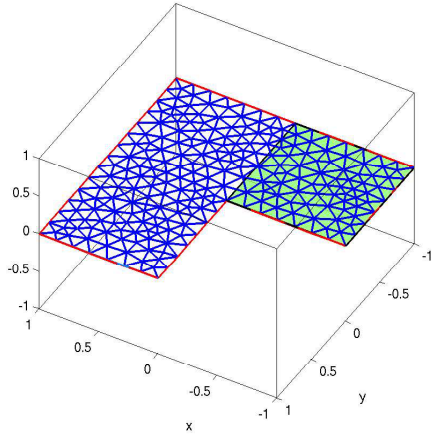


Abbildung 2: Geometrie des Problems. Grünes Gebiet: Linker unterer Rand: Ausflußbedingung, rechter oberer Rand: Dirichletbedingung, andere Ränder: kein Fluß.

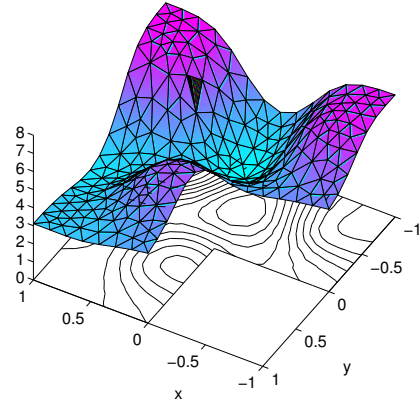


Abbildung 3: Eine Realisierung des Bodenparameters $k_8(x, \omega)$ in 8 KL-Termen.

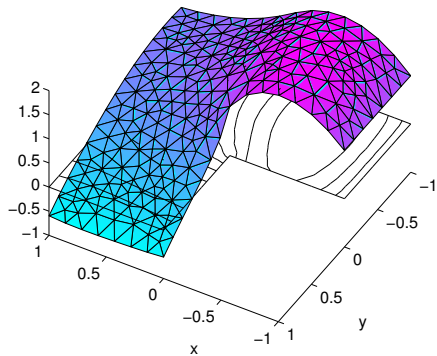


Abbildung 4: Referenzlösung Mittelwert

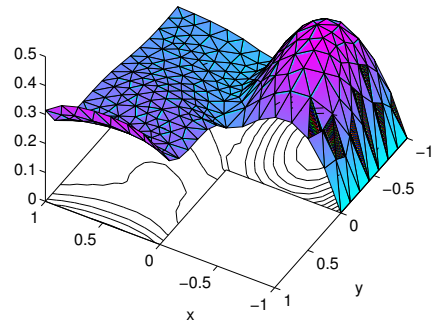


Abbildung 5: Referenzlösung Standardabweichung

Monte Carlo-Verfahren und per Smolyak Quadratur. Der Bodenparameter $\kappa(x, \omega)$ wird in 8 KL-Termen des zugrundeliegenden Gaußfeldes repräsentiert, so daß sich ein Problem in einem 8-dimensionalen Wahrscheinlichkeitsraum ergibt. Die verwendete L-förmige Geometrie sowie Randbedingungen zeigt Abbildung 2, eine Realisierung des Bodenparameters ist in Abbildung 3 zu sehen.

Referenzlösungen für den Mittelwert und die Standardabweichung des Problems wurden mit Smolyak-Quadratur S_6^8 berechnet. Als eindimensionales Qua-

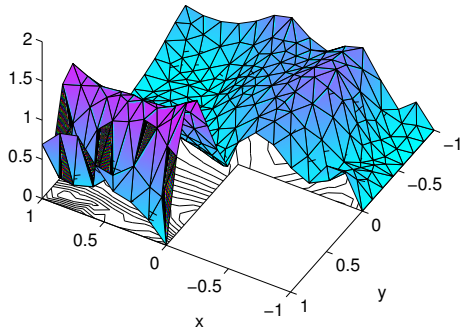


Abbildung 6: Fehler $\cdot 10^3$ im Mittelwert für Smolyak-Quadratur von Grad 4, S_4^8 in $z = 969$ in $Z = 969$ Integrationspunkten.

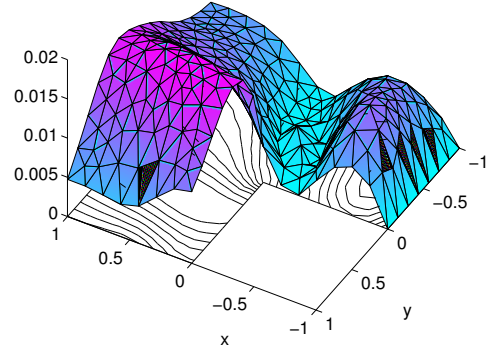


Abbildung 7: Fehler im Mittelwert für das Monte Carlo-Verfahren in $Z = 1000$ Integrationspunkten.

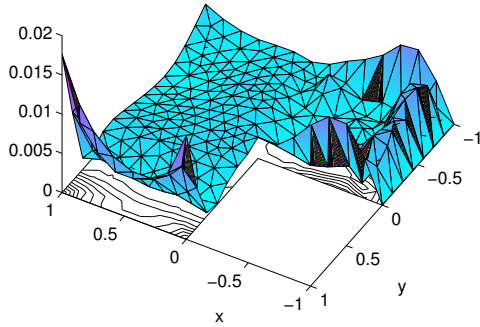


Abbildung 8: Fehler in der Standardabweichungen für Smolyak-Quadratur von Grad 4, S_4^8 in $z = 969$ Integrationspunkten.

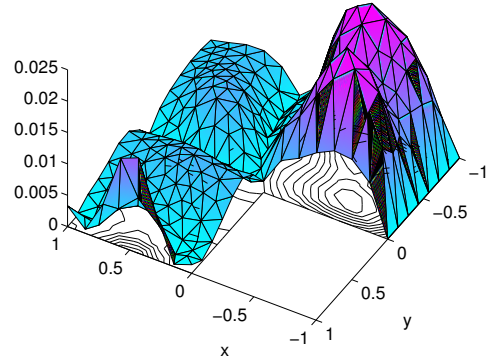


Abbildung 9: Fehler in der Standardabweichung für das Monte Carlo-Verfahren in $Z = 1000$ Integrationspunkten.

draturverfahren wurden dabei Gauß-Hermite-Formeln verwendet, dies entspricht einer exakten Integration multivariater Polynome mit totalem Grad 11. Die Integration hat insgesamt $Z = 20.345$ Integrationspunkte benutzt. Die Referenzlösungen werden in den Abbildungen 4 und 5 gezeigt.

Anschließend wurde das Problem durch Smolyak-Quadratur S_4^8 berechnet, also mit exakter Integration von Polynomen mit totalem Grad 7, welche 969 Integrationspunkte benötigt. Außerdem wurde ein Monte Carlo-Verfahren mit 1000 Auswertungen benutzt. Die absoluten Fehler von Mittelwert und Standardabweichung gegen die Referenzlösung sind in den Abbildungen 6–9 dargestellt. Es zeigt sich in diesem Beispiel, daß für den Mittelwert der Fehler der Smolyak-Quadratur etwa um den Faktor 10 besser als der Monte Carlo-Fehler ist. Das Monte Carlo-Verfahren würde zum Erreichen dieses Fehlers den etwa 100-fachen Aufwand erfordern. Die Fehler für die Standardabweichung haben die gleiche Größenordnung, wobei das Smolyak-Verfahren etwas besser zu sein scheint. Insgesamt zeigt Smolyak-Quadratur für dieses Beispiel bessere Ergebnisse als Monte Carlo.

6 Beispiel: Stochastische nichtlineare Feder

Tests für die folgenden numerischen Verfahren führen wir hier nicht für das stochastische Randwertproblem aus sondern nutzen ein einfacheres Beispiel, dessen analytische Lösung wir kennen. Die Anwendung auf das Randwertproblem erfolgt in in [20]. Das Beispiel hat nur einen räumlichen Freiheitsgrad und stellt eine Feder mit nichtlinearer Beziehung zwischen Rückstellkraft und Auslenkung $u \in \mathbb{R}$ dar. Diese wird durch die Gleichung

$$(17) \quad f(u) = 0, \quad f(u) := \kappa(u)u - 1, \quad u \in \mathbb{R}$$

beschrieben. Um ein ähnliches Modell wie in Abschnitt 2 zu erhalten, wählen wir die Federkonstante als $\kappa(u) = a + bu^2$ mit zwei unabhängigen Zufallsvariablen a, b . Ähnlich dem ersten Modellproblem stellen wir die Zufallsvariablen als nichtlineare Transformationen $a = a(\omega_1), b = b(\omega_2)$ zweier standardnormalverteilter, unabhängiger Zufallsvariablen ω_1, ω_2 dar und wählen die nichtlineare Transformation analog zu Gl. (2), so daß a und b jeweils $\beta(1/2, 1/2)$ -verteilt sind. Die Materialparameter sind somit Zufallsvariablen auf dem zweidimensionalen Wahrscheinlichkeitsraum $\Omega^{(2)}$ mit Gausmaß Γ_2 .

Die Auslenkung $u = u(\omega)$ ist nun auch eine Zufallsvariable, mit

$$(18) \quad 0 = f(u, \omega) = \kappa(u(\omega), \omega)u(\omega) - 1, \quad \omega \in \Omega^{(2)}.$$

Wie vorhin interessieren wir uns für Statistiken $s_u = \mathbf{E}(s(u))$. Diese haben die

Form

$$\begin{aligned} s_u &= \mathbf{E}(s(u)) = \int_{\Omega^{(2)}} s(u(\omega)) d\Gamma_2(\omega) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} s(u(\omega_1, \omega_2)) \exp\left(-\frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2}\right) d\omega_1 d\omega_2, \end{aligned}$$

und für eine numerische Auswertung können Quadraturverfahren in zwei Dimensionen verwendet werden. Die numerische Berechnung derartiger Integrale auch in höheren Raumdimensionen wurde bereits in Abschnitt 5 diskutiert.

7 Entwicklung in stochastischen Ansatzfunktionen

Genau wie im FEM-Verfahren für räumliche Probleme kann die Lösung auch in der stochastischen Dimension in eine Reihe von Ansatzfunktionen entwickelt werden [14]. Derartige Entwicklungen werden auch Antwortflächen (engl.: response surfaces) genannt. Es seien $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}}$ durch eine Menge \mathcal{I} indizierte linear unabhängige Funktionen $H_\alpha : \Omega^{(m)} \rightarrow \mathbb{R}$. Der Ansatz für die Lösung des räumlich bereits diskretisierten Problems Gl. (13) ist

$$(19) \quad \mathbf{u}_{n,\mathcal{I}}(\omega) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} \mathbf{u}^{(\alpha)} H_\alpha(\omega).$$

Die Vektoren $\mathbf{u}^{(\alpha)} = (u_1^{(\alpha)}, \dots, u_n^{(\alpha)})^T$ enthalten Koeffizienten für die räumlichen Ansatzfunktionen. Den Blockvektor all dieser Koeffizientenvektoren bezeichnen wir mit $\mathbf{u} = (\dots, \mathbf{u}^{(\alpha)}, \dots)^T$. Insgesamt ergibt sich mit dem FEM-Ansatz Gl. (9) der Tensorprodukt-Ansatz

$$(20) \quad u_{n,\mathcal{I}}(x, \omega) = \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} N_i(x) H_\alpha(\omega) u_i^{(\alpha)}.$$

Ist der Blockvektor \mathbf{u} bekannt, können Realisierungen der Lösung direkt erzeugt werden und somit Statistiken entweder analytisch oder mit den Verfahren des vorigen Abschnitts effizient berechnet werden.

Im Prinzip können beliebige linear unabhängige Ansatzfunktionen $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}}$ genutzt werden. In [14] und vielen darauf folgenden Arbeiten wurden multivariate Hermite-Polynome benutzt, die bekanntlich im Gaußmaß orthogonal sind und oft als polynomiales Chaos [40] bezeichnet werden. Auch falls das Wahrscheinlichkeitsmaß nicht-Gaußsch ist, können globale orthogonale multivariate Polynome, das sogenannte verallgemeinerte polynomiale Chaos, verwendet werden [41]. Für den Fall, daß die zugrundeliegenden Zufallsvariablen einen beschränkten Wertebereich haben, sind in [9] stückweise Polynome verwendet und ist in [4]

ein hp -Verfahren vorgeschlagen worden. Die Implementierung stückweiser Polynome in hochdimensionalen Wahrscheinlichkeitsräumen scheint allerdings technisch schwierig. Eine Möglichkeit zur Realisierung sind dünne Ansatzräume, die nach dem oben diskutierten Smolyak-Prinzip konstruiert werden; für Anwendungen auf räumliche Probleme siehe beispielsweise [35, 15]. Die Problematik eines nicht-Gaußschen Wahrscheinlichkeitsmaßes diskutieren wir in [25].

Wir nehmen die Lösung $u(x, \omega)$ als glatt in ω an. Ein Ansatz mit globalen Polynomen in der stochastischen Dimension scheint somit zweckmäßig. Wir verwenden multivariate Hermite-Polynome (polynomiales Chaos). Das multivariate Hermitepolynom zu einem Multiindex $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m) \in \mathbb{N}_0^m$ ist

$$H_\alpha(\omega) = \prod_{i=1}^m h_{\alpha_i}(\omega_i), \quad \omega = (\omega_1, \dots, \omega_m) \in \Omega^{(m)},$$

wobei h_j das Hermite-Polynom vom Grad j bezeichnet, und wir die H_α so normieren, daß $\mathbf{E}(H_\alpha H_\beta) = \delta_{\alpha\beta}$ ist. Wie in [14] vorgeschlagen, nutzen wir als Ansatzraum alle multivariaten Hermite-Polynome in m Variablen bis zu einem totalen Grad p , d.h. $\mathcal{I} = \{\alpha \mid |\alpha| = \sum_{i=1}^m \alpha_i \leq p\}$. Diese Wahl ähnelt der Smolyak-Konstruktion, somit könnte man $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}}$ als einen “dünnen Ansatzraum” bezeichnen.

Im weiteren diskutieren wir zwei Verfahren zur Berechnung von \mathbf{u} : das Galerkin-Verfahren und die direkte Projektion auf den orthonormalen stochastischen Ansatzraum.

7.1 Galerkin-Verfahren

Wie bei der FEM kann die Lösung per Galerkin-Verfahren berechnet werden. Der Ansatz Gl. (19) wird in die nichtlineare Gleichung Gl. (13) eingesetzt, und das Residuum wird auf die $H_\beta, \beta \in \mathcal{I}$ projiziert. Zu lösen ist das nichtlineare System mit $n \cdot |\mathcal{I}|$ gekoppelten Gleichungen

$$(21) \quad \forall \beta \in \mathcal{I} : \quad \mathbf{E} \left(\mathbf{f}(\omega, \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} \mathbf{u}^{(\alpha)} H_\alpha(\omega)) H_\beta(\omega) \right) = 0.$$

Berechnung des Residuums

Die numerische Lösung erfordert die Berechnung des Residuums und somit die Auswertung der hochdimensionalen Integrale in Gl. (21). In [19] wurden diese analytisch berechnet, indem die für glatte Funktionen $\psi : \Omega^{(m)} \rightarrow \mathbb{R}$ geltende Beziehung $\mathbf{E}(\psi(\omega) H_\alpha(\omega)) = (\alpha!)^{-1/2} \mathbf{E}(D^\alpha \psi(\omega))$ verwendet wurde [22]. Dabei ist $\alpha! = \prod_{i=1}^m (\alpha_i!)$ und D^α die dem Multiindex α entsprechende partielle Ableitung. Für beliebige nichtlineare Materialgesetze und beliebige nichtlineare Probleme ist die analytische Auswertung aber nicht immer möglich.

Eine numerische Berechnung kann mit den Integrationsverfahren aus Abschnitt 5 durchgeführt werden. Dies wird in Tabelle 1 am Beispiel der nichtlinearen Feder Gl. (18) demonstriert. Verglichen wird dabei das Verhalten des Monte Carlo-Verfahrens und des Gauß-Hermite-Quadraturverfahrens in zwei Raumdimensionen.

Totaler Polynomgrad $ \beta $ von H_β	Standard- abweichung σ von $r_\beta(\omega)$	Monte Carlo $Z = 10^6$ Fehler $\cdot 10^3$	Quadratur $Z = 36$ Fehler $\cdot 10^3$
0	0.26	0.5	≈ 0
1	0.27	0.2	0.008
2	0.61	1.2	≈ 0
3	0.77	1.5	0.07
4	2.29	4.5	≈ 0

Tabelle 1: Auswertung des Residuums für das Modellproblem der nichtlinearen Feder. Gezeigt werden die Standardabweichung des Residuums $r_\beta(\omega) = f(\omega, \sum_\alpha u^\alpha H_\alpha(\omega)) H_\beta(\omega)$ für ausgewählte β sowie die absoluten Fehler von $\mathbf{E}(r_\beta)$ bei Berechnung mit Monte Carlo-Integration bzw. mit voller Gauß-Hermite-Quadratur der Ordnung 11.

In diesem Beispiel wächst die Standardabweichung von $r_\beta(\omega) := f(\omega, \sum_\alpha u^\alpha H_\alpha(\omega)) H_\beta(\omega)$ mit steigendem $|\beta|$. Dies kann man damit erklären, daß die orthogonalen Polynome H_β mit wachsendem Grad stark oszillieren. Die nichtlineare Transformation einer oszillierenden Funktion $f(\omega, \sum_\alpha u^{(\alpha)} H_\alpha(\omega))$ bewirkt zusammen mit der Multiplikation mit dem oszillierenden H_β eine hohe Varianz des Integranden. Daher hat die direkte Monte Carlo-Integration von $\mathbf{E}(r_\beta(\omega))$ auch nach Millionen Auswertungen noch einen signifikanten Fehler. Um den Fehler im Ansatzgrad 4 auf $1 \cdot 10^{-3}$ zu reduzieren, wären etwa 20 Millionen Auswertungen nötig. Das gleiche qualitative Verhalten zeigt sich auch bei der numerischen Behandlung des nichtlinearen Grundwasserflußproblems und anderer SPDEs, vgl. [20]. Um die Effizienz der Monte Carlo-Integration zu erhöhen, käme beispielsweise die Wahl eines anderen stochastischen Ansatzraumes oder Varianzreduktion in Frage, siehe z.B. [7].

Die Quadraturfehler sind für diesen zweidimensionalen Wahrscheinlichkeitsraum $m = 2$ schon für eine kleine Zahl von Auswertungen Z vernachlässigbar. Das Residuum ist glatt in ω und eignet sich somit gut für Quadraturverfahren. Smolyak-Quadratur empfiehlt sich erst für höhere Raumdimensionen; hier ist sie ineffizienter als volle Quadratur.

Aufgrund der hohen Varianz und der Glattheit der Residuumskomponenten verwenden wir für Anwendungen auf SPDE in [20] Smolyak-Quadratur in Z

Punkten zur Berechnung des Residuums. Um Gl. (21) zu berechnen, muß somit Z -mal das stochastische Residuum $\mathbf{r}(\omega) = \mathbf{f}(\omega, \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} \mathbf{u}^{(\alpha)})$ ausgewertet werden. Die Auswertungen können erfolgen, indem ein für die Lösung des räumlichen Problems bereits existierendes FEM-Programm genutzt wird. In der Regel erfordert dabei jede Auswertung von $\mathbf{r}(\omega)$ eine numerische Integration über dem räumlichen Gebiet der SPDE. Die transparente Nutzung eines existierenden FEM-Programms für das numerische Lösen von SPDEs werden wir in einer anderen Veröffentlichung im Detail beschreiben.

Lösen des nichtlinearen Gleichungssystems

Zur Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems Gl. (21) verwenden wir BFGS mit Liniensuche, siehe z.B. [26, 10]—weitere Details des Verfahrens beschreiben wir in [19, 20]. In jedem Schritt wird eine Korrektur des aktuellen Lösungsblockvektors \mathbf{u}_k als

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{k+1} - \mathbf{u}_k &= -\mathbf{H}_k \mathbf{f}(\mathbf{u}_k), \\ \mathbf{H}_k &= \mathbf{H}_0 + \sum_{j=1}^k (\alpha_j \mathbf{p}_j \mathbf{p}_j^t + \beta_j \mathbf{q}_j \mathbf{q}_j^t) \end{aligned}$$

berechnet. Die Blockvektoren $\mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j$ und die Skalare α_j, β_j ergeben sich aus den vorigen Iterationen des BFGS-Verfahrens [26, 10]. Für gute Konvergenz wird ein Vorkonditionierer \mathbf{H}_0 benötigt, und wir verwenden hier einen Block-diagonalen Vorkonditionierer. Jeder Block auf der Block-Diagonale ist dabei die Jacobi-Matrix des deterministischen Systems, das sich ergibt, wenn der Mittelwert der stochastischen Felder eingesetzt wird.

Die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems wird hier experimentell nur für das erste Modellproblem, die nichtlineare Feder, getestet. Experimente für das Grundwasserflußproblem zeigen wir in [19, 20].

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Auslenkung zeigt Abbildung 11. Sie wurde durch eine Monte Carlo-Simulation ermittelt. Die nichtlineare Feder wurde in einem zweidimensionalen Wahrscheinlichkeitsraum modelliert, eine Diskretisierung stochastischer Felder war daher nicht nötig. Wir haben einen Ansatz in polynomialem Chaos von Grad 4 vorgenommen und das Galerkin-Verfahren durchgeführt, wobei die Residuen per Quadratur berechnet und das nichtlineare Gleichungssystem mit BFGS gelöst wurde. Die Abnahme des Residuums in Abbildung 11 zeigt eine lineare Konvergenz in 12 Iterationen. In Abbildung 12 zeigen wir die exakte Auslenkung $u(\omega_1, \omega_2)$ über dem zweidimensionalen Wahrscheinlichkeitsraum. Die durch das Galerkin-Verfahren berechnete Näherung zeigt Abbildung 13. Beim Vergleich der beiden Abbildungen sollte berücksichtigt werden, daß bei der Bildung von Statistiken noch die Multiplikation mit dem Gauß-Maß erfolgt. In Anbetracht dessen liegt eine gute Übereinstimmung von exakter und approximativer Lösung vor.

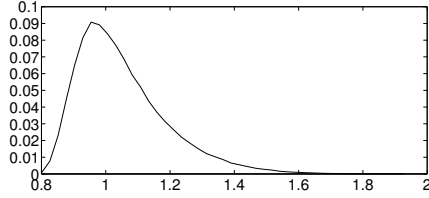


Abbildung 10: Wahrscheinlichkeitsdichte der Auslenkung $u(\omega)$, aus Monte Carlo-Simulation.

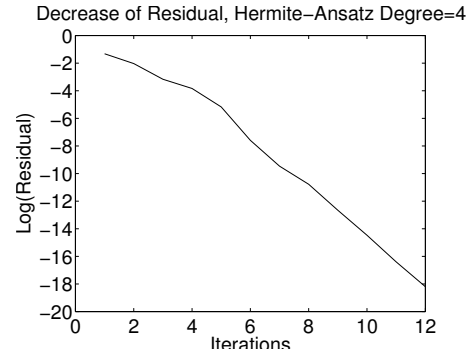


Abbildung 11: Abnahme des Residuums, nichtlineare Feder, Ansatz: polynomiales Chaos mit totalem Grad 4.

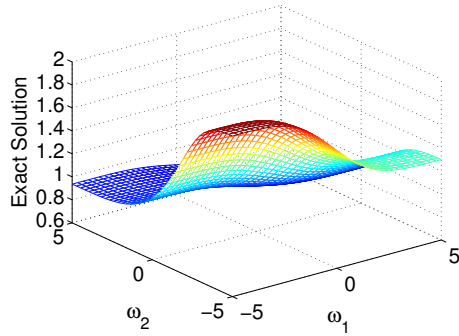


Abbildung 12: Die exakte Lösung für die Auslenkung $u(\omega_1, \omega_2)$ als Graph in ω_1, ω_2 .

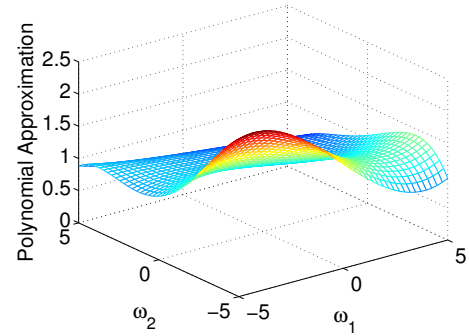


Abbildung 13: Die approximierte Lösung $u^a(\omega_1, \omega_2)$ in polynomialen Chaos von Grad 4.

7.2 Direkte Projektion

Indem die Orthonormalität der H_α genutzt wird, kann die Lösung auch durch direkte Projektion berechnet werden. Offensichtlich ist

$$(22) \quad \forall \alpha \in \mathcal{I} : \quad \mathbf{u}^{(\alpha)} = \mathbf{E}(\mathbf{u}(\omega) H_\alpha(\omega)).$$

Diese Form der Berechnung wird auch “non-intrusive” SFEM genannt [13]. Die Auswertung kann mit einem Integrations-Verfahren des vorigen Abschnittes erfolgen. Verwendet das Integrationsverfahren Z Auswertungen in $\Omega^{(m)}$, so ist zur Berechnung von \mathbf{u} die Lösung von Z ungekoppelten Problemen $\mathbf{f}(\omega, \mathbf{u}(\omega)) = 0$ erforderlich. Dies führt uns wieder zurück zur ursprünglichen Monte Carlo-Simulation, aber mit einem anderen Quadraturverfahren. Die Lösung durch direkte Projektion wird in [20] weiter untersucht.

8 Schlußbemerkung

Die Lösung nichtlinearer stochastischer Probleme beginnt mit der Näherung in einer endlichen Zahl m unabhängiger Zufallsvariablen. Jedes der vorgestellten Lösungsverfahren erfordert die numerische Berechnung von Erwartungswerten. Dies sind Integrale im m -dimensionalen Wahrscheinlichkeitsraum bezüglich des Wahrscheinlichkeitsmaßes, und eine wichtige Herausforderung bei der Lösung stochastischer Probleme ist die effiziente Berechnung dieser Integrale für mittlere bis hohe stochastische Raumdimensionen.

Zur Berechnung der Integrale haben wir volle Tensorprodukt-Quadraturverfahren, Smolyak-Quadraturverfahren und Monte Carlo-Verfahren verwendet. Aufgrund des „Fluchs der Dimensionen“ sind volle Tensorprodukt-Quadraturverfahren nur für kleine stochastische Dimensionen nutzbar (etwa $m \leq 6$). Smolyak-Quadraturverfahren eignen sich auch für höhere Raumdimensionen, z.B. wurden sie in [32] auf finanzmathematische Probleme in $m = 360$ Raumdimensionen angewendet. Monte Carlo-Integrationsverfahren sind in beliebigen Raumdimensionen praktikabel, sind aber teuer, wenn eine hohe Genauigkeit verlangt wird, oder wenn die Varianz des Integranden hoch ist.

Welches Integrationsverfahren für eine Anwendung gewählt werden sollte, hängt von der stochastischen Dimension m , der Varianz und der Glattheit des Integranden ab. Die vorgestellten Ergebnisse zeigen, daß sich Smolyak-Quadraturverfahren auch im Bereich der stochastischen Mechanik als effiziente Alternative zu Monte Carlo-Verfahren anbieten und mehr Aufmerksamkeit verdienen. Als praktischer Vorteil spricht für sie auch, daß sie sehr einfach in existierende Monte Carlo-Codes eingebaut werden können. Für sehr hohe Raumdimensionen und Integranden mit kleiner Varianz empfehlen sich weiterhin Monte Carlo-Verfahren.

Zur Lösung der stochastischen Randwertprobleme haben wir drei Verfahren verwendet: die direkte Berechnung von Statistiken, das Galerkin-Verfahren in einem stochastischen Ansatzraum und die direkte orthogonale Projektion auf diesen Ansatzraum. Weitergehende Experimente und Vergleiche der Verfahren sind noch erforderlich und erfolgen in weiteren Veröffentlichungen [20, 25].

Danksagung:

Wir danken Dr. Knut Petras für die Einführung in das Smolyak-Quadraturverfahren.

Literatur

- [1] Robert J. Adler. *The Geometry of Random Fields*. John Wiley & Sons, Chichester, 1981.

- [2] Kendall E. Atkinson. *The Numerical Solution of Integral Equations of the Second Kind*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [3] Ivo Babuška und Panagiotis Chatzipantelidis. On solving linear elliptic stochastic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191:4093–4122, 2002.
- [4] Ivo Babuška, Raúl Tempone, und Georgios E. Zouraris. Galerkin finite element approximations of stochastic elliptic partial differential equations. Technical Report TICAM Report 02-38, Texas Institute for Computational and Applied Mathematics, University of Texas, Austin, Texas, 2002. <http://www.ticam.utexas.edu/reports/0238.pdf>.
- [5] Fred E. Benth und Jon Gjerde. Convergence rates for finite element approximations for stochastic partial differential equations. *Stochastics and Stochastics Reports*, 63:313–326, 1998.
- [6] Paul Besold. *Solutions to Stochastic Partial Differential Equations as Elements of Tensor Product Spaces*. Doctoral thesis, Georg-August-Universität, Göttingen, 2000.
- [7] Russel E. Caflisch. Monte Carlo und quasi-Monte Carlo methods. *Acta Numerica*, 7:1–49, 1998.
- [8] George Christakos. *Random field models in earth sciences*. Academic Press, New York, 1992.
- [9] Manas K. Deb, Ivo Babuška und J. Tinsley Oden. Solution of stochastic partial differential equations using Galerkin finite element techniques. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:6359–6372, 2001.
- [10] John E. Dennis, Jr. und Robert B. Schnabel. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*. SIAM, Philadelphia, PA, 1996.
- [11] Roger Ghanem. Ingredients for a general purpose stochastic finite elements implementation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 168(1–4):19–34, 1999.
- [12] Roger Ghanem. Stochastic finite elements for heterogeneous media with multiple random non-Gaussian properties. *Journal of Engineering Mechanics*, 129(1):24–40, 1999.
- [13] Roger Ghanem, 2003. personal communication.

- [14] Roger Ghanem und Pol D. Spanos. *Stochastic finite elements—A spectral approach*. Springer, Berlin, 1991.
- [15] Michael Griebel, Peter Oswald und Thomas Schiekofer. Sparse grids for boundary integral equations. *Numerische Mathematik*, 83(2):279–312, 1999.
- [16] Achintya Haldar und Sankaran Mahadevan. *Reliability assessment using stochastic finite element analysis*. John Wiley & Sons, Chichester, 2000.
- [17] Helge Holden, Bernt Øksendal, Jan Ubøe und Tu-Sheng Zhang. *Stochastic Partial Differential Equations*. Birkhäuser, Basel, 1996.
- [18] Andreas Keese. *A review of recent developments in the numerical solution of stochastic PDEs (Stochastic Finite Elements)*. Informatikbericht 2003-6, Technische Universität Braunschweig, in Vorbereitung.
- [19] Andreas Keese und Hermann G. Matthies. Efficient solvers for nonlinear stochastic problems. In *Proceedings of the Fifth World Congress on Computational Mechanics*, 7.-12. July, Wien, 2002. ISBN 3-9501554-0-6.
- [20] Andreas Keese und Hermann G. Matthies. Numerical methods and Smolyak quadrature for nonlinear stochastic partial differential equations. *SIAM Journal of Scientific Computing*, submitted.
- [21] Michael Kleiber und Tran Duong Hien. *The Stochastic Finite Element Method. Basic Perturbation Technique and Computer Implementation*. John Wiley & Sons, Chichester, 1992.
- [22] Paul Malliavin. *Stochastic Analysis*. Springer, Berlin, 1997.
- [23] Hermann G. Matthies, Christoph E. Brenner, Christoph G. Bucher und C. Guedes Soares. Uncertainties in probabilistic numerical analysis of structures and solids—stochastic finite elements. *Structural Safety*, 19(3):283–336, 1997.
- [24] Hermann G. Matthies und Christian G. Bucher. Finite elements for stochastic media problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 168:3–17, 1999.
- [25] Hermann G. Matthies und Andreas Keese. Galerkin-methods for stochastic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, in preparation.

- [26] Hermann G. Matthies und Gilbert Strang. The solution of nonlinear finite element equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 14:1613–1626, 1979.
- [27] Harald Niederreiter. *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods*. SIAM, Philadelphia, PA, 1992.
- [28] Erich Novak. Numerische Verfahren für hochdimensionale Probleme und der Fluch der Dimension. *Jahresbericht der DMV*, 101:151–177, 1999.
- [29] Erich Novak und Klaus Ritter. High dimensional integration of smooth functions over cubes. *Numerische Mathematik*, 75:79–97, 1996.
- [30] Erich Novak und Klaus Ritter. Simple cubature formulas with high polynomial exactness. *Constructive Approximation*, 15:499–522, 1999.
- [31] Manuel Pellissetti und Roger Ghanem. Iterative solution of systems of linear equations arising in the context of stochastic finite elements. *Advances in Engineering Software*, 31(8-9):607–616, 2000.
- [32] Knut Petras. Fast calculation of coefficients in the Smolyak algorithm. *Numerical Algorithms*, 26:93–109, 2001.
- [33] Brian D. Ripley. *Statistical inference for spatial processes*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [34] Gerhart I. Schuëller (editor). A state-of-the-art report on computational stochastic mechanics. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 14(4):197–321, 1997.
- [35] Christoph Schwab und Radu-Alexandru Todor. *Sparse Finite Elements for Elliptic Problems with Stochastic Data*. Research Report No. 2002-05, ETH Zürich, 2002.
- [36] Sergey A. Smolyak. Quadrature und interpolation formulas for tensor products of certain classes of functions. *Soviet Mathematics Dokl.*, 4:240–243, 1963.
- [37] Bruno Sudret und Armen Der Kiureghian. Stochastic finite element methods and reliability. A state-of-the-art-report. Technical Report UCB/SEMM-2000/08, University of California, Berkeley, 2000.
- [38] Harry L. Van Trees. *Detection, Estimation and Modulation Theory, Part 1*. Wiley & Sons, Chichester, 1968.

- [39] Erik Vanmarcke. *Random Fields: Analysis and Synthesis*. The MIT Press, Cambridge, MA, 3rd edition, 1988.
- [40] Norbert Wiener. The homogeneous chaos. *American Journal of Mathematics*, 60:897–936, 1938.
- [41] Dongbin Xiu und George E. Karniadakis. The Wiener-Askey polynomial chaos for stochastic differential equations. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 24(2):619–644, 2002.
- [42] Dongbin Xiu, Didier Lucor, Chau-Hsing Su und George E. Karniadakis. Stochastic modeling of flow-structure interactions using generalized polynomial chaos. *ASME Journal of Fluid Engineering*, 124:51–69, 2002.

1999-01	A. Zeller	Yesterday, my program worked. Today, it does not. Why?
1999-02	P. Niebert	A Temporal Logic for the Specification and Verification of Distributed Behaviour
1999-03	S. Eckstein, K. Neumann	Konzeptioneller Entwurf mit der Unified Modeling Language
1999-04	T. Gehrke, A. Rensink	A Mobile Calculus with Data
2000-01	T. Kaiser, B. Fischer, W. Struckmann	The Modula-2 Proving System MOPS
2000-02	J. Saperia, J. Schönwälder	Policy-Based Enhancements to the SNMP Framework
2000-03	A. Casties	Finite-Element-Interpolation der räumlichen Dichten eines Vielteilchensystems auf ungeordneten Gittern
2000-04	J. Koslowski	A 2-dimensional view of the Chu-construction
2000-05	S. Eckstein, P. Ahlbrecht, K. Neumann	Von parametrisierten Spezifikationen zu generierten Informationssystemen: ein Anwendungsbeispiel
2000-06	F. Strauß, J. Schönwälder, M. Mertens	JAX - A Java AgentX Sub-Agent Toolkit
2000-07	F. Strauß	Advantages and Disadvantages of the Script MIB Infrastructure
2000-08	T. Gehrke, U. Goltz	High-Level Sequence Charts with Data Manipulation
2000-09	T. Firley	Regular languages as states for an abstract automaton
2001-01	K. Diethers	Tool-Based Analysis of Timed Sequence Diagrams
2002-01	R. van Glabbeek, U. Goltz	Well-behaved Flow Event Structures for Parallel Composition and Action Refinement
2002-02	J. Weimar	Translations of Cellular Automata for Efficient Simulation
2002-03	H. G. Matthies, M. Meyer	Nonlinear Galerkin Methods for the Model Reduction of Nonlinear Dynamical Systems
2002-04	H. G. Matthies, J. Steindorf	Partitioned Strong Coupling Algorithms for Fluid-Structure-Interaction
2002-05	H. G. Matthies, J. Steindorf	Partitioned but Strongly Coupled Iteration Schemes for Nonlinear Fluid-Structure Interaction
2002-06	H. G. Matthies, J. Steindorf	Strong Coupling Methods
2002-07	H. Firley, U. Goltz	Property Preserving Abstraction for Software Verification
2003-01	M. Meyer, H. G. Matthies	Efficient Model Reduction in Non-linear Dynamics Using the Karhunen-Loève Expansion and Dual-Weighted-Residual Methods
2003-02	C. Täubner	Modellierung des Ethylen-Pathways mit UML-Statecharts
2003-03	T.-P. Fries, H. G. Matthies	Classification and Overview of Meshfree Methods
2003-04	A. Keese, H. G. Matthies	Fragen der numerischen Integration bei stochastischen finiten Elementen für nichtlineare Probleme
2003-05	A. Keese, H. G. Matthies	Numerical Methods and Smolyak Quadrature for Nonlinear Stochastic Partial Differential Equations
2003-06	A. Keese	A Review of Recent Developments in the Numerical Solution of Stochastic Partial Differential Equations (Stochastic Finite Elements)